

# パルスレーザーアブレーション法におけるプルーム衝突過程の流体シミュレーション

藤井里沙<sup>1</sup>, 土井健太郎<sup>2</sup>, 横山泰寛<sup>2</sup>, 福岡寛<sup>3</sup>, 杉村陽<sup>2</sup>, 富永望<sup>2</sup>, 須佐元<sup>2</sup>, 梅津郁朗<sup>2</sup>  
神戸大<sup>1</sup>, 甲南大理工<sup>2</sup> 奈良高専<sup>3</sup>

E-mail : 122s422s@stu.kobe-u.ac.jp

## 1 INTRODUCTION

我々のグループではダブルパルスレーザーアブレーション法を用いた複合ナノ粒子の創成を行なっている。雰囲気ガス中でのパルスレーザーアブレーションは強い非平衡状態下でナノ粒子を作る一つの方法である。最近、2つのプルームの衝突が提案されたことによってプルーム膨張プロセスのダイナミクスを制御する方法が予想されている。発生した2つのプルームが衝突し、混ざり合う事で、様々な構造を持つ複合ナノ粒子ができる可能性がある。実験観測およびプルーム膨張プロセスの数値流体シミュレーションは、プルーム膨張のプロセスにおいて衝突の効果を明らかにする方法である。本研究はこの実験に対し、プルームの流体シミュレーションを行うことで、衝突の状況を知り、生成されるナノ結晶の構造制御に役立つことを期待した。

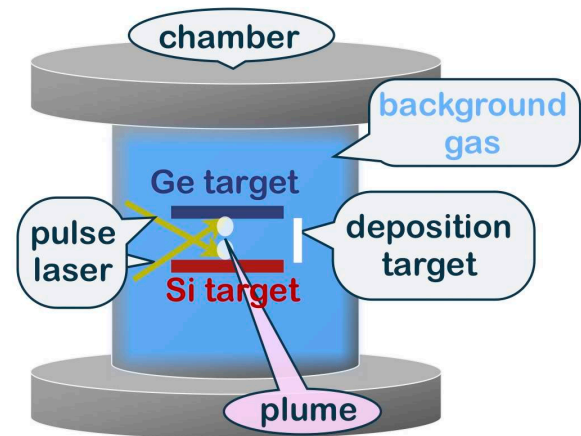


Figure1 実験装置図

## 2 EXPERIMENTAL

図1は実験装置図である。円筒形の chamber 中を真空にした後、Heなどの気体を注入する。そこへSiとGeの半導体基板を図1のように配置し、パルスレーザーを照射する。

## 3 NUMERICAL METHOD & INITIAL CONDITION

2点の点源爆発を仮定し、流体の衝撃波の計算を行った。計算の手法は、東京工業大学の矢部孝氏によるCIP法を用いた。この手法は、プロファイルを3次関数で補完するため、衝撃波面の鈍りが少ないという利点がある。また、2次元円筒軸対称座標系を用いた。計算に用いた基礎方程式は、圧縮性流体の式で、

連続の式, 運動方程式, エネルギー方程式の3つである.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\nabla(\rho \cdot \vec{v}) \quad (3.1)$$

$$\rho \left( \frac{\partial v_x}{\partial t} + (\vec{v} \cdot \nabla v_x) \right) = -\nabla P \quad (3.2)$$

$$\rho \left( \frac{\partial v_y}{\partial t} + (\vec{v} \cdot \nabla v_y) \right) = -\nabla P \quad (3.3)$$

$$\frac{\partial e}{\partial t} = -\nabla((e + P) \cdot \vec{v}) \quad (3.4)$$

$\rho$ :密度,  $\vec{v}$ :流体の速度,  $P$ :圧力,  $e$ :内部エネルギーである.

エネルギー方程式は連続の式と  $e = \frac{1}{\gamma - 1} \frac{P}{\rho}$  を用いて変形し,

$$\frac{\partial P}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla P = -\gamma P(\nabla \cdot \vec{v}) \quad (3.5)$$

となる. また, このシミュレーションでは He, Ge, Si の3成分の流体を計算するため, 連続の式のみをそれぞれの成分の密度で計算を行い, 3流体での計算を行った.

レーザーの出力, 周波数, パルス幅は表1とし, レーザー1発分の照射による蒸発量を 10ng と仮定し, 密度を算出した. レーザーの出力から, 気体分子運動論によるエネルギーの式と理想気体の状態方程式を用い, 圧力, 温度, を計算した.

$$E = \frac{3}{2} NkT \quad (3.6)$$

$$PV = NkT \quad (3.7)$$

|    | 密度 [ $kg/m^3$ ] | 圧力 [Pa]           | 温度 [K]            | レーザー (出力, 周波数, パルス幅) |
|----|-----------------|-------------------|-------------------|----------------------|
| Si | 0.038           | $6.3 \times 10^7$ | $5.2 \times 10^6$ | 0.11W, 10Hz, 10ns    |
| Ge | 0.038           | $7.4 \times 10^7$ | $1.4 \times 10^7$ | 0.13W, 10Hz, 10ns    |
| He | 0.042           | 260               | 300               | -                    |

## 4 RESULTS AND DISCUSSION

雰囲気ガスのガス圧, 260[Pa] で, double pals laser を用いた時のプルームの進展を計算した結果, 圧力は Figure2 のようになった.

一方, 実験でのプルームの写真は Figure3 のようになっており, 衝撃波同士が衝突する時間スケールが大体一致するという結果となった. これは, おおよその初期値や方程式の見積りが正しいことを示しており, シミュレーションによる, 実験への助言が可能であるということである.

この実験ではナノ結晶の複数の構造の生成を目標としているため, 本研究はシミュレーションによる, この目標の達成の有無の確認を行った. 成分ごとの密度と流体の流れの向きをプロットした Figure4 をみると, 初め, プルーム内の Si, Ge の高密度の部分は衝撃波とともに膨張するが, やがて, 衝撃波同士の干渉により押し戻されてしまう. 高密度部分はお互いに混ざり合うことなく基板に沿った方向へ流れるだけで, 時間が経過してしまう. この結果から, レーザーの同時照射では Si, Ge は短時間で混ざることができず, それぞれのプルーム内で結晶化すると考えられる. 結晶化したものは流体では取り扱うことができなくなるた

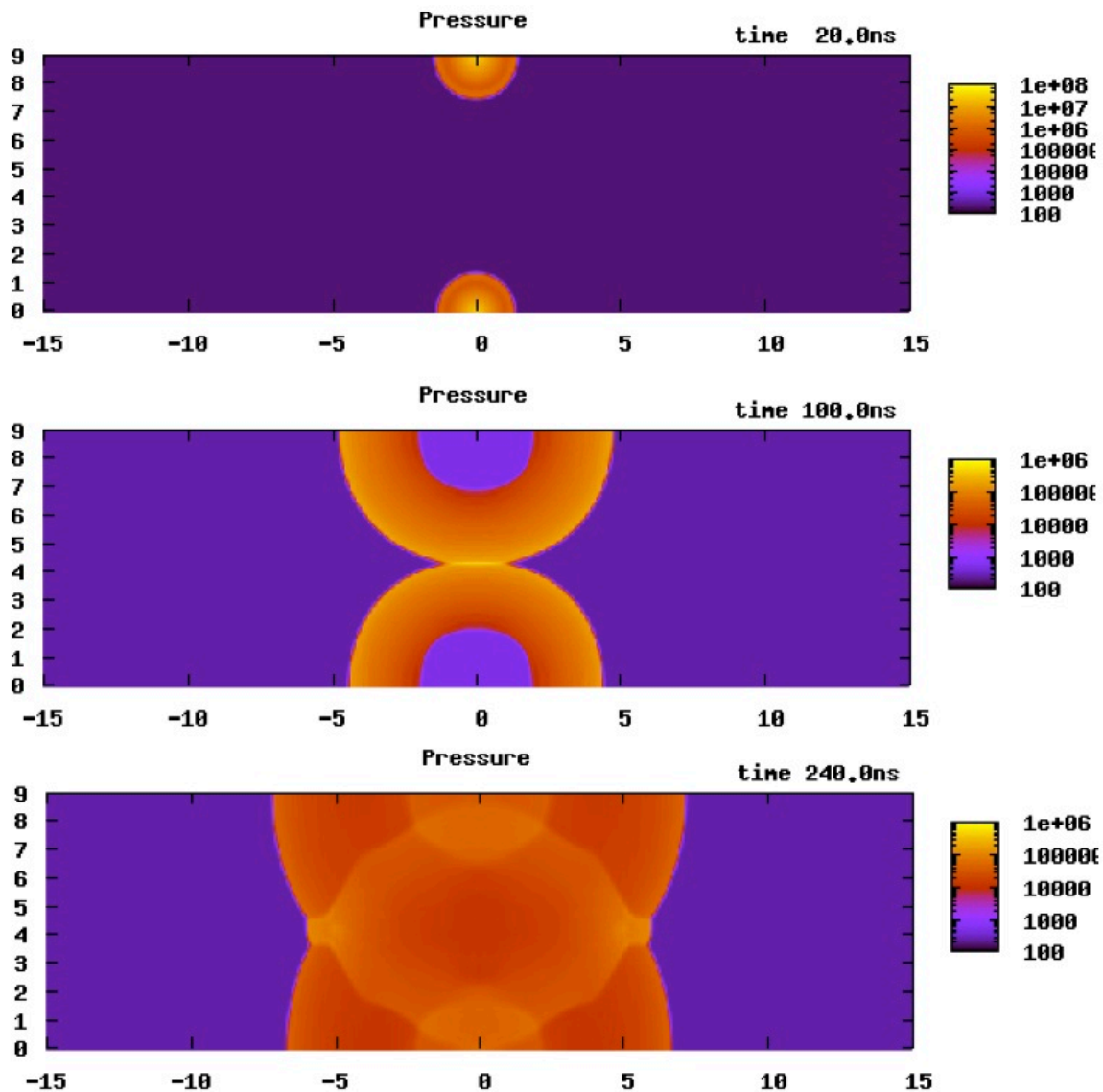


Figure2 double レーザー， 雰囲気ガスのガス圧 260Pa， レーザー照射後 20ns,100ns,240ns 後の pressure の図 [Pa]

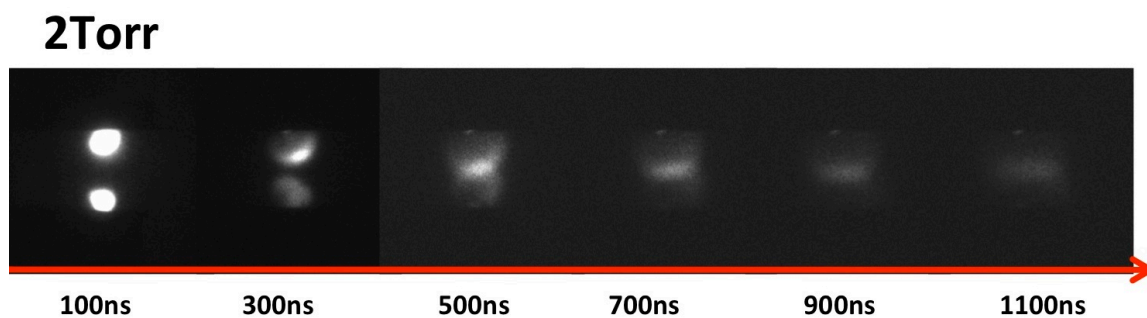


Figure3 実験でのプルームの写真， 雰囲気ガスのガス圧 266Pa， Si 側のレーザー出力 0.11W,Ge 側 0.13W. 左から右に時間が進む.

め、詳細は不明だが、Si と Ge の結晶は拡散し、衝突したもののいずれかは結合し、異種混合ナノ結晶ができる可能性があると考えられる。

また、レーザーの照射タイミングをずらしたシミュレーション Figure5 も行った。この場合は、まず Si 基板にレーザーを照射する。その後 700ns 後に Ge 基板にレーザーを照射する。そうすると、Si のプルームが膨張したところへ Ge のプルームが突っ込んでいく事になり、強いせん断応力が起きることで、流体は不安定になり、Si と Ge は短時間で混ざりやすくなる。Si,Ge が結晶化する前にこの2つを混ぜられる可能性が高くなり、混晶ナノ結晶ができると推測される。delay のタイミングにより、混ざり度合いは変化するので注意する必要がある。

以上のことから流体計算を用いて本実験のシミュレーションを行うことが可能であり、また、本研究から、同じ装置を用いての結晶の作り分けが可能であるということが言える。

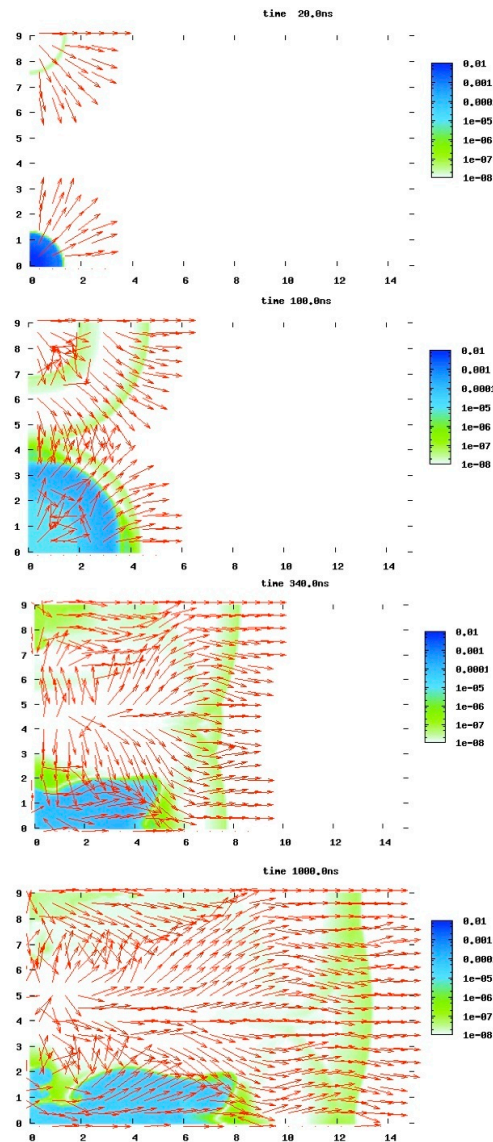


Figure4 左: Si の密度 [ $\text{kg}/\text{m}^3$ ], 右: Ge の密度 [ $\text{kg}/\text{m}^3$ ] と流体の流れを示す矢印.

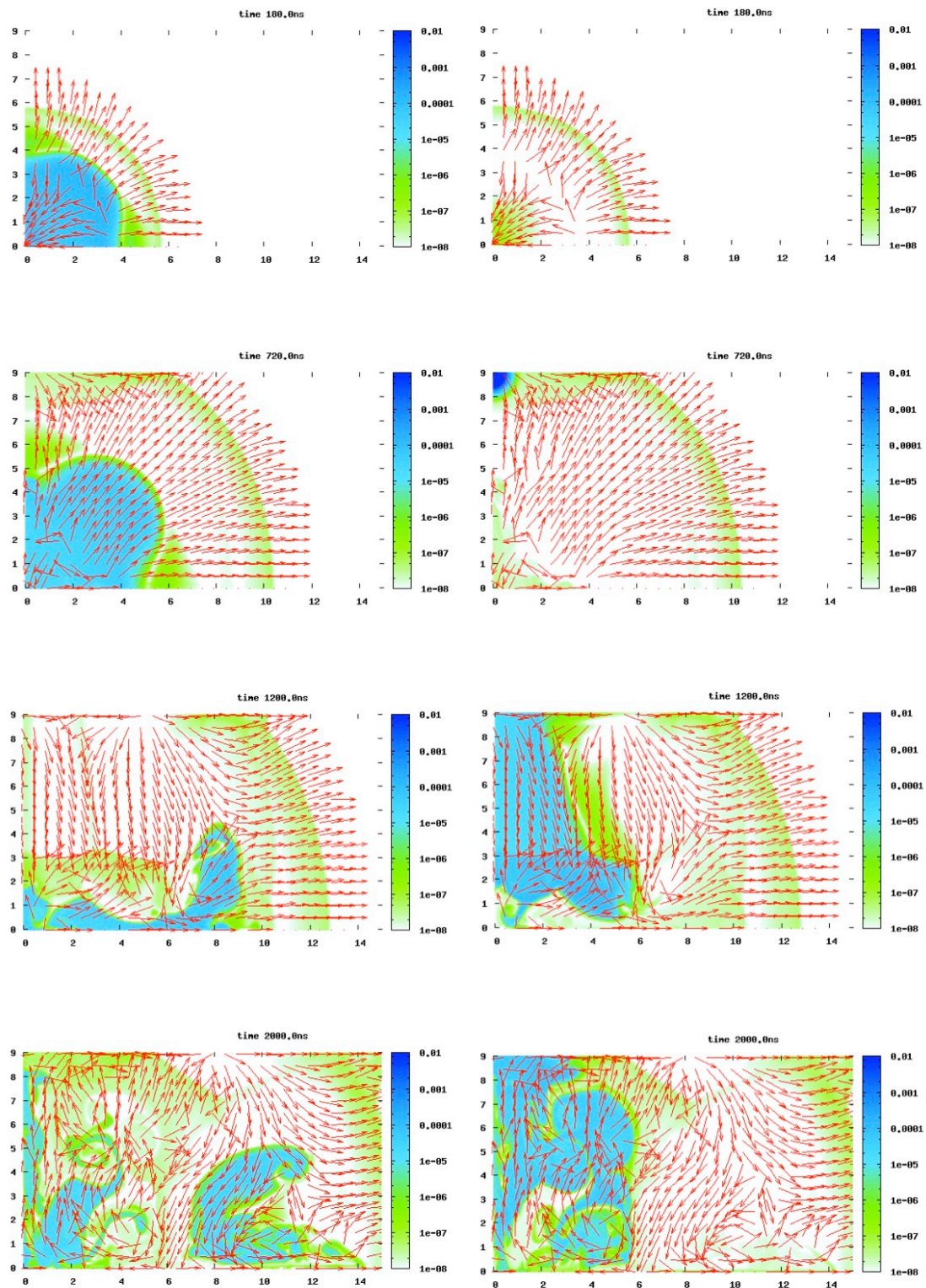


Figure5 左: Si の密度 [kg/m<sup>3</sup>], 右: Ge の密度 [kg/m<sup>3</sup>] と流体の流れを示す矢印. Si 側へレーザー照射後 700ns 後に Ge 側へレーザー照射.

## 5 ACKNOWLEDGEMENT

この研究を行うにあたり、共同研究者の皆様には大変お世話になり、感謝しております。また、京都大学基礎物理学研究所にも感謝申し上げます。"2012年度天文・天体物理若手夏の学校"でのワークショップ YITP YITP-W-12-08 の間の議論は、この研究に関する有益な情報を得るものでした。